



## 液晶液滴における欠陥構造の理論

著者	菅家 正幹
学位授与機関	Tohoku University
学位授与番号	11301甲第15817号
URL	<a href="http://hdl.handle.net/10097/58647">http://hdl.handle.net/10097/58647</a>

氏名	かんけ まさき
氏名	菅家 正幹
研究科，専攻の名称	東北大学大学院工学研究科（博士課程）応用物理学専攻
学位論文題目	液晶液滴における欠陥構造の理論
論文審査委員	主査 東北大学教授 佐々木 一夫 東北大学教授 藤原 巧 東北大学教授 高橋 正彦 東北大学准教授 宮寄 博司

## 論文内容要約

ネマチック液晶液滴（半径  $1\mu\text{m}$  程度）は、相転移・臨界現象の研究対象として古くから注目を集めてきた。特に、ネマチック液晶液滴に、外場（電場や磁場）を印加したときの振舞いは、液晶の秩序構造の興味深い例の一つとして、学術的に研究されてきただけでなく、外場の閾値や応答速度といったディスプレイ動作への応用という面でも関心を集めている。例えば、液晶分子が放射状に配向したヘッジホッグ型液晶液滴（図 1(a)）に外場を印加すると、ある外場強度を境にして、軸対称構造（図 1(b)）へ一次転移することが実験的に報告されている。この相転移を理論的に説明しようと試みた研究はいくつか存在するが、完全な理論がないことから、この問題はソフトマター基礎物理学における課題の一つになっている。本研究の最終的な目標は、外場による相転移の問題を理論的に解決することにある。このため、簡単のために、まず外場なしでの平衡構造がどのようなものかを詳細に調べた。そして、この結果を踏まえ、外場の問題に取り組み、理論的に外場による相転移の問題を解決することを試みた。以下に本論文の概要を述べる。

### 第 1 章 序論

本章では、本研究の背景と課題について述べた。物理屋が液晶液滴に興味を持つ理由を、工学的観点や学術的観点の両方から説明した。特に、電場や磁場といった外場がない状態で、どのような平衡状態を取りうるのか、そして、外場に対して、液晶がどのように振舞うのかを実験的立場の先行研究を基に説明した。これらを踏まえ、過去の理論の問題点を述べ、本論文で取り組むべきことを説明した。

### 第 2 章 研究目的

序論で述べた過去の理論研究の問題点を踏まえ、本章では、本論文の研究目的を明確にした。本論文の最終的な目標は、外場（特に電場）による相転移の問題を理論的に解決することにある。しかし、外場なしでの状況でも、平衡状態が明らかになっていないので、簡単のために、まず外場なしの場合の問題を解決するべきであると説明した。

### 第 3 章 Mori-Nakanishi 理論によるディスクリネーションループの数値解

本章では、外場なしで、液晶液滴の平衡構造がどのようなものかを Mori-Nakanishi の理論を用いて、計算した。外場なしでの液晶の平衡構造は従来、液滴中心部分に点状の欠陥構造を持つヘッジホッグ構造と考えられてきたが、この理論によって、環状の欠陥構造を持つディスクリネーションループを持つ構造（図 1(c)）が

安定であることが明らかになった。ただし、液滴半径とアンカリング強度が共に無限大の場合の理論である。Mori-Nakanishi の理論は液滴中心部分の真の構造はディスクリネーションループであることを初めて主張した理論であるが、Euler 方程式を解くことなく、解析されているので、完全なものとは言い難い。しかし、従来、液滴中心部分の構造はヘッジホッグと考えられてきたため、この結果はかなりのインパクトを持って受け入れられた。この理論が提出されてから、多くの研究者がこの問題に取り組んだが、Mori-Nakanishi 理論自体がどれほど正確なものなのかを明らかにしたものはない。本章では、Mori と Nakanishi に従って、ヘッジホッグよりディスクリネーションループが安定かを、配向分布をベクトルで記述する Frank-Oseen モデルを用い Euler-Lagrange 方程式を解いて調べた。

その結果、Mori-Nakanishi の理論は液晶の配向分布を非常に精度良く記述できることが明らかになった。そして、Mori と Nakanishi が結論付けたように、ヘッジホッグよりディスクリネーションループの方が安定であった。しかし、非常に大きな欠点も明らかになった。その欠点とは、配向分布をベクトル的に記述したため、位相欠陥を特異点として扱うため、位相欠陥で配向分布を記述できないことである。このため、ベクトル的な記述では、位相欠陥部分でのエネルギーを記述することができないので、現象論的にコアエネルギーを導入する必要がある。Mori-Nakanishi 理論では液晶の配向分布が現象論的に導入したコアエネルギーに強く依存している。コアエネルギーの正確な値は不明なため、配向分布を正確に決定することはできない。したがって、ベクトル的に配向分布を記述する Mori-Nakanishi 理論では、配向分布を正確に決定することができないことが分かった。

#### 第 4 章 ディスクリネーションループの有限アンカリング強度による相転移理論

第 3 章で明らかになったように、配向分布をベクトルで記述する Frank モデルでは、位相欠陥を記述できず、計算結果がコアエネルギーに非常に強く依存してしまうので、本章では Landau-de Gennes モデルを用いて、外場なしでの平衡構造を計算した。このモデルでは、配向分布をベクトルではなくテンソル  $Q_{\alpha\beta}$  で記述するため、位相欠陥を数値的に扱うことができ、位相欠陥を含む数値シミュレーションを行う際、非常に有効なモデルである。このモデルでは自由エネルギー  $\mathcal{F}$  は次のように記述される。

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_{\text{LdG}} + \mathcal{F}_{\text{el}} + \mathcal{F}_{\text{s}}, \quad (1)$$

$$\mathcal{F}_{\text{LdG}} = \int_{|\mathbf{r}| < R} d\mathbf{r} \left[ -\frac{1}{2} A Q_{\alpha\beta} Q_{\alpha\beta} - \frac{1}{3} B Q_{\alpha\beta} Q_{\beta\gamma} Q_{\gamma\alpha} + \frac{1}{4} C Q_{\alpha\beta} Q_{\alpha\beta} Q_{\gamma\delta} Q_{\gamma\delta} \right], \quad (2)$$

$$\mathcal{F}_{\text{el}} = \int_{|\mathbf{r}| < R} d\mathbf{r} \frac{L_1}{2} \partial_\alpha Q_{\beta\gamma} \partial_\alpha Q_{\beta\gamma}, \quad (3)$$

$$\mathcal{F}_{\text{s}} = -w \int dS \nu_\alpha \nu_\beta Q_{\alpha\beta}. \quad (4)$$

ここで、 $\alpha, \beta, \gamma = x, y, z$  を意味し、 $A, B, C$  は温度に依存する現象論的パラメータ、 $L_1$  は液晶の弾性定数、 $R$  は液滴半径、 $w$  はアンカリング強度、 $\nu$  は液滴表面に垂直な単位ベクトル、 $\partial_x \equiv \partial/\partial x$  である。また、アインシュタインの規約を用いて自由エネルギーは表現されている。また、現実の物質に対応するように、本章

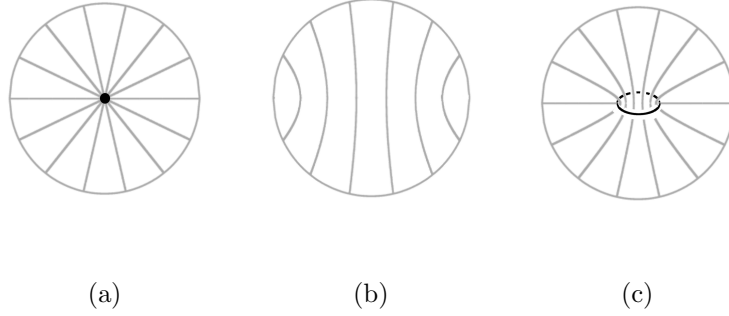


図1 (a) ヘッジホッグ構造、(b) 軸対称構造、(c) 小さなディスクリネーションループを持つ構造。灰色の線はダイレクタフィールドを表し、黒の点および線は欠陥、ディスクリネーションを意味している。

ではアンカリング強度  $w$  と液滴半径  $R$  がともに有限として計算を実行した。アンカリング強度無限大の場合や液滴半径無限大の場合を調べている理論研究は存在するが、実際の物質とかけ離れているので、再考される必要がある。

Landau-de Gennes 理論を用いて計算した結果、アンカリング強度が強い場合にはヘッジホッグ構造は不安定となり、ディスクリネーションループを持つ構造が安定となるが、アンカリング強度が弱い場合には、軸対称構造が安定となることが判明した。つまり、あるアンカリング強度  $\bar{w}_c$  を境にして、ディスクリネーションループから軸対称構造への相転移が起きる。ただし、 $\bar{w}$  は無次元のアンカリング強度を意味し、ネマチック相関長  $\xi = \sqrt{L_1/A}$  を用いて、 $\bar{w} \equiv w/A\xi$  と表せる。相転移が起きる無次元化した臨界アンカリング強度  $\bar{w}_c$  と液滴半径  $R$  をネマチック相関長で規格化した無次元の液滴半径  $\bar{R} \equiv R/\xi$  の関係は

$$\bar{w}_c = 4.95 \left( \frac{1}{\bar{R}} \right) - 13.1 \left( \frac{1}{\bar{R}} \right)^2 \quad (5)$$

とで結ばれることが分かった。

## 第5章 磁場中におけるディスクリネーションループの安定性

本章ではディスクリネーションループに磁場をかけた場合、液晶配向が磁場に対してどのように振舞うのかを議論した。過去の類似の理論研究に、Kralj と Žumer によるものがあるが、彼らは、ヘッジホッグに静磁場を印加するとある磁場強度を境にして、軸対称構造への一次相転移が起こると理論的に見出した。しかし、配向分布をベクトルの的に記述している点や、ヘッジホッグに磁場をかけている点で、再考される余地がある。第4章で明らかにしたように、ヘッジホッグよりディスクリネーションループの方が安定であるから、ディスクリネーションループに磁場をかけて計算するべきである。

調べた結果、磁場によって、小さなディスクリネーションループは軸対称構造へ相転移することが明らかになった。本章では、二つの構造の自由エネルギーの比較から、臨界磁場強度  $H_{\text{crit}}$  を数值的に計算し、先行研究の結果と比較した。

## 第6章 電場中のディスクリネーションループの相転移理論

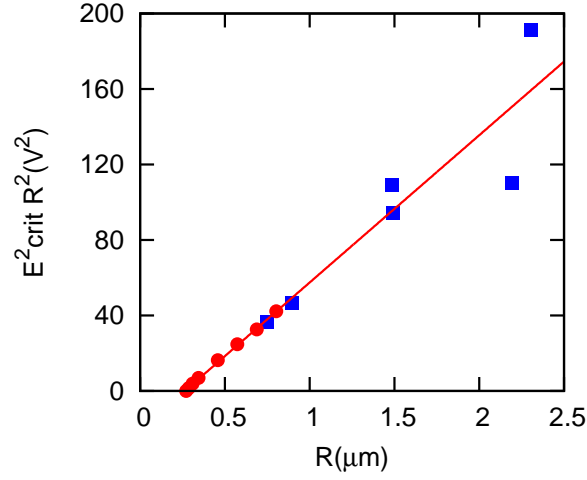


図 2 実験データとの比較。赤の丸が理論値を意味し、青の四角が実験値を意味している。また、直線は理論値をフィッティングしたものである。

本章では、電場中のディスクリネーションループの相転移を議論した。実験的には、ヘッジホッグに電場をかけるとある電場強度  $E_{\text{crit}}$  を境にして、軸対称構造への一次相転移が報告されている。しかし、本研究で明らかにしたように、ヘッジホッグよりディスクリネーションループの方が安定なので、ディスクリネーションループから軸対称構造への相転移が起きているのであろう。過去の理論研究では、Euler 方程式と Maxwell 方程式を連立させて解くことが困難なので、電場分布を一樣電場と仮定して解いてるため、再考されるべきである。そこで、本研究では、smooth-particle の方法を用いて、これらの方程式を連立させて解くことを可能にし、理論的に臨界電場強度  $E_{\text{crit}}$  を求めた。

Landau-de Gennes 理論を用いて計算した結果と実験を比較したものを、図 2 に示す。ただし、液晶物質のパラメータを典型的液晶物質パラメータ  $L_1 = 8.6\text{pN}$ 、 $w = 1.5 \times 10^{-4}\text{J/m}^2$ 、 $\varepsilon_{\parallel} = 16$ 、 $\varepsilon_{\perp} = 6$ 、 $\varepsilon_p = 3.6$  として計算した。ただし、 $\varepsilon_{\parallel}$ 、 $\varepsilon_{\perp}$  は液晶の誘電率、 $\varepsilon_p$  は液滴周りの等方的媒質の誘電率を意味している。グラフを見ると、実験データをほぼ再現していることが分かる。

## 第 7 章 総括

本章では、本研究の総括を行った。本研究では、まず外場なしでの平衡状態を議論し、有限アンカリングの下でもディスクリネーションループの方が安定になる事を示した。そして、ディスクリネーションループが磁場や電場に対してどのように振舞うのかを数値的に調べた。特に電場の場合には、smooth-particle の方法を用いて、Euler 方程式と Maxwell 方程式を連立させて解くことに初めて成功し、理論的に臨界電場強度を導出することに初めて成功した。